準安定および不安定状態の崩壊の確率過程(非線型・非平衡状態の統計力学,研究会報告)

冨田, 博之

準安定および不安定状態の崩壊の確率過程

京大・理　冨田博之

狭い意味での相転移現象に限らず多くの場合に，２つ以上の安定点をもつような問題にしばしば出会う。ここでは，そのような問題で，確率過程を支配するマスター方程式が与えられた時，準安定あるいは不安定状態の崩壊過程を固有値問題として解き，特に崩壊速度が体系の大きさにどのように依存するか，を議論したい。結論の詳細は既にいくつか発表してあるので御参照いただきたい。[1)]

このような問題では，局所安定性を扱う線型理論では明らかに限界があり，マスター方程式の大域的安定性を調べる必要がある。従ってある程度厳密な議論を行うためには，どうしても固有値問題に帰さねばならない。

マスター方程式は平衡状態で詳細つりあいが成立っている時，自己随伴型に変換することができる。言いかえれば，詳細つりあいが成立つ時には，マスター方程式の固有値は実数であり，安定な定常解をもつならば，固有値のひとつはゼロ，他はすべて正（もちろん定義によるが）と言える。この変換を次のようなフォッカー・プランク方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial F}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial x}\right) P(x,t) \tag{1}$$

に適用すれば，

$$P(x,t) = P_0(x)^{1/2}\,\psi(x,t)\ , \quad P_0(x) \propto \exp\left\{-F(x)/\varepsilon\right\} \tag{2}$$

とおいて，

$$\begin{aligned} -\varepsilon\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) &= \mathscr{H}\psi(x,t) \\ \mathscr{H} &= -\varepsilon^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \\ V(x) &= \left(F'(x)/2\right)^2 - \varepsilon F''(x)/2 \end{aligned} \tag{3}$$

と，シュレーディンガー方程式に変換される。ε は任意でよいが，ここでは，体系の大きさ Ω の逆数， $\varepsilon=\Omega^{-1}$ を表わすとする。[2] たとえば，ワイス近似の動的イジングモデルでは，Ω はスピンの数Nで，x は磁化密度M／N，F(x) は1スピン当りの自由エネルギーに $\beta=1/(kT)$ をかけたものである。ただし，遷移確率はNに比例する[2]とし，2次モーメントは定数と仮定して (1) が得られる。

準安定状態の問題は次のように議論できる。F(x) として，

$$F(x) = F_0(x) - H x$$

とし，$F_0(x)$ は十分深い2つの極小をもつ対称な函数，例えば

$$F_0(x) = \frac{1}{4} x^4 - \frac{1}{2} x^2$$

を考えよう。$F_0(x)$ の具体的な形は特に重要ではなく，$x=0$ で極大，$x=\pm a$ で極小となること以外は，後の議論で使われるのは，

$$\varDelta F_0 = F_0(0) - F_0(a), \quad \gamma = F_0''(a), \quad \gamma^* = |F_0''(0)|$$

だけである。まず $H=0$ の場合を考えよう。

このような $F_0(x)$ に対しては，ポテンシャル V(x) は，3つの井戸 — $x=0$ に底の高さ $\varepsilon\gamma^*$，$x=\pm a$ に高さ $-\varepsilon\gamma$ — を持ちスピノダル点すなわち $F_0(x)$ の変曲点に障壁をもつ。こうして，このようなポテンシャルの中での固有値問題，すなわち

$$\psi(x, t) = e^{-\lambda t}\,\phi(x)$$

とおいて，

$$\varepsilon\lambda\phi(x) = \left[-\varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\phi(x) \tag{4}$$

を解くことに帰着する。基底状態は，明らかに，

$$\lambda_0 = 0, \quad \phi_0 = P_0(x)^{1/2} \propto \exp\left[-F_0(x)/2\varepsilon\right]$$

であり，第一励起状態は，左，右の底での近似的な基底状態 $\psi_L(x)$，$\psi_R(x)$ を用いて

$$\phi_0 = (\psi_L + \psi_B)/\sqrt{2}$$

$$\phi_1 = (\psi_L - \psi_R)/\sqrt{2}$$

と仮定すれば，ε が十分小さい時，

$$\lambda_1 \cong \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\sqrt{\gamma\gamma^*}\ e^{-\Delta F_0/\varepsilon} \tag{5}$$

となる。これは Langer 等[3] により全く別の考え方から求められている 核形成速度と同じ形をしている。実際，平衡分布への接近は，始状態として，

$$\psi(x, 0) = \phi_0 + \phi_1 = \sqrt{2}\ \psi_L$$

すなわち，左側の底に局在化した準平衡分布をとっておけば，

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \phi_0 + \phi_1 e^{-\lambda_1 t} \\ B(x, t) &= P_0(x) + \phi_0 \phi_1\ e^{-\lambda_1 t} \end{aligned} \tag{6}$$

となり，λ_1 を緩和定数と考えてよい。次に，$H \fallingdotseq 0$，すなわち非対称になり，極小値の相対差がある場合を考えよう。この時は，ポテンシャルは

$$V(x) - \frac{H}{2} F_0'(x) + \frac{H^2}{4}$$

となり，摂動的な扱いが可能である。普通の摂動展開を行うと，

$$\lambda_1(H) - \lambda_0(H) = \lambda_1(0.) \left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{aH}{\varepsilon}\right)^2 + \cdots\cdots \right] \tag{7}$$

が得られるが，ε が Ω^{-1} というように非常に小さい時には，これは現実的ではない。研究会では，ε を入れない計算で (7) を示したが，以上の理由から，その後の計算で補足しておきたい。

外場 H が，F(x) に対する仮定 —— 2つの底が十分深い —— を損わない程度に小

さい時（$H \ll \Delta F_0$）には，摂動のある場合の波動函数 $\tilde{\phi}_0$，$\tilde{\phi}_1$ は，やはり ψ_L, ψ_R 従って無摂動の時の ϕ_0，ϕ_1 で構成できると考えられる。そこで，

$$\tilde{\phi}_0 = u(H)\,\phi_0 - v(H)\,\phi_1$$

$$\tilde{\phi}_1 = v(H)\,\phi_0 + u(H)\,\phi_1$$

$$u^2 + v^2 = 1$$

と仮定し，変分法で固有値を求めることにする。その結果，

$$\lambda_1(H) - \lambda_0(H) \cong \lambda_1(0)\left[1 + \left(\frac{aH}{\varepsilon}\right)^2\right]^{1/2} \tag{8}$$

が得られ，$H \ll \varepsilon$ の時 (7) となる。基底状態 $\lambda_0(H)$ は，本来ゼロとなるべきなのであるが，この近似の範囲内では，そうはならない。無視された効果が，$\lambda_0(H)$，$\lambda_1(H)$ に同じ寄与を与えると仮定できれば，$\Delta F_0 \gg H \gg \varepsilon$ に対して (8) は

$$\lambda_1(H) \cong \frac{a|H|}{\varepsilon}\,\lambda_1(0) \tag{9}$$

となり，崩壊速度は $H = 0$ の時の (5) と比べれば，非常に大きくなる，逆に言えば，共存状態 ──$H = 0$── の動的安定性を示していると言えよう。(5)，(8) については数値計算の結果と定量的な比較を行う予定である。

参考文献

1) H. Tomita, A. Itō and H. Kidachi, Prog. Theor. Phys. **55** (1976), No. 3;
H. Tomita, ibid.
冨田「物性研究」1976年1月号

2) R. Kubo, K. Matsuo and K. Kitahara, J. Stat. Phys. **9** (1973), 51.

3) 例えば
J. S. Langer, Ann. Phys. (N.Y.) **54** (1969), 258.